



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE  
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2017/2018

Nº de proyecto 127

**Página web orientada a la evaluación “*in silico*” de  
nuevas sustancias con interés biológico**

Responsable del Proyecto;  
Eva Ramos Alonso

Facultad de Veterinaria

Departamento de Farmacología y Toxicología

## 1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El principal objetivo que nos planteamos fue proporcionar a los alumnos, tanto de Grado como de Posgrado, un entorno de aprendizaje virtual adaptativo donde poner en práctica los conocimientos de toxicología adquiridos en las clases teóricas, complementando e incrementando así el conocimiento aplicado. Y que los alumnos adquirieran experiencia práctica en el manejo de datos toxicológicos y herramientas virtuales que cada día están más presentes en la vida profesional, llevando a cabo procedimientos experimentales predictivos y evaluaciones toxicológicas *in silico* con herramientas reales.

Para ello se planteó diseñar y elaborar una página web donde se engloben todos aquellos enlaces de herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos on-line, y de esta manera, responder a la necesidad de crear un entorno de fácil acceso que incluya las numerosas herramientas a las que se puede acceder, con el valor añadido de los tutoriales o textos explicativos para su comprensión y utilización.

Con todo ello, el principal objetivo es lograr que los alumnos aprendan, no solo a cómo usar e interpretar los datos, sino también a la aplicación potencial de dichos datos obtenidos a través de los sistemas *in silico*.

## 2. Objetivos alcanzados

Globalmente, el objetivo inicial planteado ha sido alcanzado. Se ha elaborado un entorno web donde se engloban enlaces de herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos on-line. "<http://insilitox.velixea.com>"

Hemos denominado esta web como "*INSILITOX*", y se ha estructurado como una interfaz donde no solamente se encuentran reunidos los enlaces a las mencionadas herramientas, sino que además cuenta con textos e imágenes donde se explica detalladamente en qué consisten estas herramientas determinando así su utilidad.

Todas las herramientas a las que se hace referencia son de reconocido prestigio en el ámbito científico, conjuntamente suponen la creación de un entorno que facilita el acceso directo a las principales herramientas a las que se puede acceder gratuitamente y que además consta de un valor añadido con tutoriales y textos explicativos para su comprensión y utilización.

La experiencia de los miembros que participan en el proyecto trabajando con estas herramientas on-line ha sido fundamental para el desarrollo del proyecto. Ha facilitado que los alumnos puedan manejar datos toxicológicos, con aplicación tanto real como potencial a través de los sistemas *in silico*.

Además, hemos tenido la oportunidad de participar en foros internacionales de educación superior donde se ha divulgado la experiencia.

Los objetivos planteados al inicio del proyecto han sido suficientemente alcanzados y nos sirven como punto de partida para seguir evolucionando la web ofreciendo un entorno cada vez más amplio y completo. Lo que repercute directamente en el aprendizaje de los alumnos.

### 3. Metodología empleada en el proyecto

Se han realizado reuniones de los miembros del equipo para la puesta en común de las herramientas más importantes a incluir en la web y para definir el grado de implicación específico de cada miembro del proyecto.

Se ha diseñado una página web intuitiva. Donde se recopilan las más importantes herramientas, validadas por las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Se han elaborado una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en la web.

Finalmente, los resultados se han divulgado en foros y congresos de educación internacionales como INTED.

### 4. Recursos humanos

El grupo está formado por un equipo de trabajo interdisciplinar consolidado en el ámbito de la toxicología, las evaluaciones *in silico* y la creación de entornos web.

La totalidad del equipo ha sido esencial en el desarrollo del proyecto conforme al plan de trabajo presentado.

Los miembros del equipo poseen numerosas evaluaciones positivas y excelentes del Programa Docencia de la UCM, proyectos de innovación docente, publicaciones y contribuciones docentes lo cual demuestra la relevante trayectoria en innovación docente del grupo.

### 5. Desarrollo de las actividades

En las primeras reuniones mantenidas entre los miembros del equipo para la puesta en común de aquellas herramientas que tenían mayor relevancia e interés para los estudiantes e investigadores se definieron las que consideramos más importantes para la evaluación de la toxicidad de nuevas sustancias de interés biológico a incluir en la web. En esta reunión también se definieron las actividades específicas de cada miembro del proyecto.

Posteriormente se ha procedido a elaborar una página web intuitiva, donde hemos recopilado las más importantes herramientas, que además cuentan con el respaldo y la validación de las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Dentro de cada una de ellas hemos incluido una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en las distintas herramientas recopiladas.

Esta página se ha alojado en la Sección de Toxicología de la página web del Departamento para ofrecer una fácil accesibilidad tanto a los alumnos como a investigadores interesados en este campo.

Finalmente, los resultados se han divulgado en foros y congresos de educación internacionales como INTED.

## 6. Anexo (capturas de la página web)

En este apartado se incluyen capturas de pantalla extraídas de la página web.



# INSILITOX

WEB ORIENTADA A LA TOXICOLOGÍA IN SILICO

**COSMOS**

SEGURIDAD  
COSMÉTICOS ➡

*in silico* toxicology gmbh

RELACIÓN ESTRUCTURA - ACTIVIDAD ➡

**ToxBank**

TEST DE  
COMPUESTOS ➡



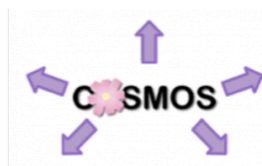
SCREENING QUÍMICO ➡



## Herramienta Gratuita Para La Predicción De La Seguridad De Compuestos Cosméticos Para Humanos Ofrece:

PREDICCIÓN DE TOXICIDAD IN SILICO

EXTRAPOLACIONES  
INVITRO - IN VIVO



ALGORITMOS  
FLEXIBLES

NUEVAS BASES DE DATOS  
TOXICOLÓGICAS

TTC;  
THRESHOLD OF TOXICOLOGICAL  
CONCERN, RELACIONADO CON  
COSMÉTICOS



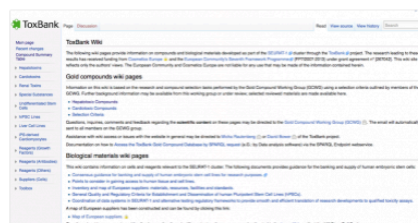
- ToxBank ofrece un centro de datos toxicológicos, con depósitos y bases de datos de sustancias modelo. Con recursos de referencia para células, líneas celulares y tejidos relevantes para la investigación de la toxicidad sistémica.
- ToxBank apoya las actividades de gestión y análisis de datos llevadas a cabo a través de estrategias alternativas.

CENTRO DE DATOS

Requiere registro



WIKI COMPUESTOS Y BIO





(DSSTOX) DATABASE ➡

DSSToxes una base de datos que proporciona un recurso público de alta calidad para la toxicología predictiva

Mapeo de bioensayos y propiedades fisicoquímicas de sustancias asociadas a su estructura química

El ICSSTox Cast Dashboards una herramienta interactiva para la distribución, visualización y uso de los datos de toxicidad por determinación química

*in silico* toxicology  
(DSSTOX) DATABASE

### ANÁLISIS DE LA RELACIÓN ESTRUCTURA QUÍMICA ACTIVIDAD (QSAR).

A partir de una estructura química, proporciona predicciones de una gran variedad de propiedades tóxicas.

Para calcular las predicciones, utiliza un sistema automatizado y reproducible.

Los fundamentos de las predicciones, las estimaciones del dominio de aplicabilidad y los resultados de la validación se presentan en una interfaz gráfica clara para el examen crítico por parte de expertos en toxicología.

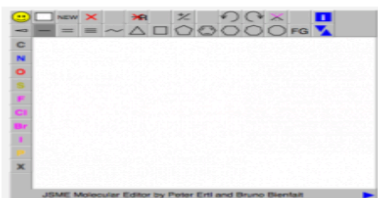
1. INSERTAR  
ESTRUCTURAS QUÍMICAS



2. SELECCIONAR  
"END POINTS"



3. PREDECIR



- A. TOXICIDAD AGUDA
- B. ATRAVIESA BHE
- C. CARCINOGENICIDAD
- D. DOSIS MAXIMA DIARIA RECOMENDADA
- E. MUTAGENICIDAD

- A. RESULTADOS
- B. ESTRUCTURAS SIMILARES